

QUI2668 – Tópicos Especiais em Química Analítica

Aplicações do Software R em quimiometria

e química ambiental

Detalhamento da disciplina de pós-graduação proposta

1. Disciplina:

Nível: Mestrado e Doutorado

Carga Horária: 60 horas

Créditos: 4

Pré-requisitos: Nenhum

2. Súmula

Nessa disciplina serão aplicados os principais métodos estatísticos utilizados em química analítica e ambiental, aplicando as ferramentas deste software gratuito e amplamente difundido.

3. Objetivos

- Introduzir os conceitos de estatística básica e avançada aplicados ao R na área de química e química ambiental
- Discutir as principais estratégias de tratamento de dados e interpretação dos mesmos.
- Apresentar alguns pacotes básicos para exposição de dados científicos e aquisição de dados.

4. Conteúdo Programático

1. Introdução: a) Histórico do programa R , b) Pacotes do R ; c). Comandos básicos no R ; d). Entrada de dados ; e). Representação gráfica;

2. Estatística Básica no R: a) Medidas de localização e dispersão ; b). Distribuições de probabilidades ; c) Homocedasticidade ; d) Teste de hipóteses. e) Análise de variância; f) Teste de Kruskal-Wallis; g) Teste de Friedman; h) Transformação Box-Cox; i) Coeficientes de correlação e covariância.

3. Estatística Avançada em R: a) Análise de regressão linear; b) Análise de regressão múltipla; c) Multicolinearidade; d) Análise de covariância; e) Transformação e padronização de dados; f) Análise de agrupamento; g) Análise de componentes principais; g) Análise de função discriminante; h) Análise de escalonamento multidimensional, i) Análise de correspondência canônica e redundância, j) Testes de permutação, l) Teste de permutação de Mantel; m) Amostragem probabilística

4. Pacotes específicos do R com aplicações a quimiometria e meio ambiente. a) pacote GGLOT e COWPLOT para confecção de gráficos; b) pacote GGMAP para confecção de mapas (distribuição de concentração, pontos de amostragem, etc); c) pacote AKIMA para interpolação de malhas irregulares; d) pacote CHEMOMETRICS aplicado a quimiometria; e) Pacote OPENAIR para modelagem de dispersão atmosférica; f) Pacote MARMAP para adquirir dados de batimetria disponíveis pela NOAA e confecção de mapas; g) Pacote GGTERN para confecção de diagramas ternários.

5. Avaliação

A avaliação ocorrerá através de exercícios/tarefas diárias em sala de aula.

6. Metodologia de Ensino

Disciplina de caráter teórico e prático, consistindo de aulas expositivas e resolução de problemas no R por parte do aluno.

7. Bibliografia

Akima, H.; Gebhardt, A. 2016. akima: Interpolation of Irregularly and Regularly Spaced Data. R package version 0.6-2. <https://CRAN.R-project.org/package=akima>

Alain F. Zuur I; Elena N. Ieno; Erik H.W.G. Meesters. 2009. **A Beginner's Guide to R**. Springer. ISBN 978-0-387-93836-3. DOI 10.1007/978-0-387-93837-0

Carlsaw, D. C. and K. Ropkins, 2012 openair --- an R package for air quality data analysis. **Environmental Modelling & Software**. Volume 27-28, 52-61.

8. Bibliografia Complementar

D. Kahle and H. Wickham. ggmap: Spatial Visualization with ggplot2. **The R Journal**, 5(1), 144-161. URL <http://journal.r-project.org/archive/2013-1/kahle-wickham.pdf>

Eric Pante, Benoit Simon-Bouhet 2013 marmap: A Package for Importing, Plotting and Analyzing Bathymetric and Topographic Data in R. **PLoS ONE** 8(9): e73051. doi:10.1371/journal.pone.0073051

Filzmoser, P.; Varmuza, K. 2017. chemometrics: Multivariate Statistical Analysis in Chemometrics. R package version 1.4.2. <https://CRAN.R-project.org/package=chemometrics>

Husson, François; Lê Sébastien; Pagès, Jerome. 2011. **Exploratory multivariate analysis by example using R**. CRC Press - Taylor & Francis Group. ISBN 978-1-4398-3580-7

John Maindonald;W. John Braun. 2003. **Data Analysis and Graphics Using R – an Example-Based Approach**. Cambridge University Press. ISBN-13 978-0-511-71286-9

Ron Wehrens. 2011. **Chemometrics with R: Multivariate Data Analysis in the Natural Sciences and Life Sciences**. Springer ISBN 978-642-17840-5

Wickham, H. 2009. **ggplot2: Elegant Graphics for Data Analysis**. Springer-Verlag New York.

Wilke, C. O. 2016. cowplot: Streamlined Plot Theme and Plot Annotations for 'ggplot2'. R package version 0.7.0. <https://CRAN.R-project.org/package=cowplot>